統計力学の数学的基礎

荒木 不二洋（東京理科大学 理工学部 数学科）

1999年8月2日

1 量子物理学—無限自由度の場合

1.1 物理系の記述

$$\begin{array}{rcl} \text{物理量}\,Q & - & \text{測定値}\,q \\ \text{関数}\,f(Q) & - & \text{測定値}\,f(q) \\ \text{状態}\,\varphi & - & \text{統計的記述＝測定値の分布：測度}\,d\mu_\varphi(q) \\ \text{実験データ} & - & \text{期待値：}\varphi(Q) = \int f(q)\,d\mu_\varphi(q) \end{array}$$

1.2 無限系の物理量

定義 複素係数の * 環 $\mathfrak{A}$ ($A, B \in \mathfrak{A}$, $c \in \mathbf{C} \longrightarrow A + B, cA, AB, A^* \in \mathfrak{A}$) にノルム ($A \in \mathfrak{A} \longrightarrow \|A\| \geq 0$, ノルムの公理を満たす) が定義されていて、完備であり、かつ C^* ノルムの性質 ($\|A^*A\| = \|A\|^2$) が満たされているとき $\mathfrak{A}$ を <u>C^* 環</u>という。

定義 C^* 環 $\mathfrak{A}$ の $\mathcal{H}$ 上の<u>表現</u> π とは

$$\begin{cases} \text{(i) ヒルベルト空間 } \mathcal{H} \\ \text{(ii)* 準同形 } \pi\text{: } A \in \mathfrak{A} \longrightarrow \pi(A) : \mathcal{H} \text{ 上の有界線形作用素} \end{cases}$$

の組を言う。

準同形 $\pi(A + B) = \pi(A) + \pi(B)$, $\pi(cA) = c\pi(A)$,
$\pi(AB) = \pi(A)\pi(B)$, $\pi(A^*) = \pi(A)^*$

定理 自動的に $\|\pi(A)\| \leq \|A\|$. (連続)

定義 $\pi(A) = 0$ は $A = 0$ に限るとき、表現 π は<u>忠実</u>であるという。

定理 このとき、すべての A について $\|\pi(A)\| = \|A\|$。すなわち、忠実な表現はノルムを含めてもとの C^* 環と全く同形。

基本定理　C^* 環は、ヒルベルト空間上の作用素がなすノルム閉な * 環とノルム * 同形。

C^* 環の具体的定義　ヒルベルト空間上の作用素のノルム閉な * 環

例　量子スピン格子系 — スピン $\frac{1}{2}$ の場合

$n = (n_1, n_2, ..., n_d) \in \mathbf{Z}^d$ (d 次元格子)

$\sigma_x^{(n)}, \sigma_y^{(n)}, \sigma_z^{(n)}$ パウリ行列 ：格子点 n のスピン $\frac{1}{2}$ を記述

$n \neq m$ ならば $\left[\sigma_\alpha^{(n)}, \sigma_\beta^{(m)}\right] = 0$(可換)　$(\alpha, \beta = x, y, z)$

$\left\{\sigma_\alpha^{(n)} | \alpha = x, y, z; n \in \mathbf{Z}^d\right\}$ は物理量がなす C^* 環を生成する[1]。

1.3　無限系の状態

定義　C^*環 $\mathfrak{A}$ 上の「正規化された正線形汎関数」を $\mathfrak{A}$ の状態という。

$$\begin{cases} \text{汎関数} : A \in \mathfrak{A} \longrightarrow \varphi(A) \in \mathbf{C} \ \ (A = A^* \text{ならば期待値}) \\ \text{線形} : \varphi(A+B) = \varphi(A) + \varphi(B)\ ,\ \varphi(cA) = c\varphi(A) \\ \text{正規化} : \|\varphi\| = 1 (1 \in \mathfrak{A} \text{のときは} \varphi(1) = 1 \text{で十分}) \\ \text{正} : \text{任意の} A \in \mathfrak{A} \text{について} \varphi(A^*A) \geq 0 \end{cases}$$

基本定理　(Gelfand, Naimark, Segal)

(1)φ が $\mathfrak{A}$ の状態ならばつぎの三つ組が存在する。

$$\begin{cases} \text{ヒルベルト空間 } \mathcal{H}_\varphi \\ \mathcal{H}_\varphi \text{上の } \mathfrak{A} \text{ の表現} \pi_\varphi \\ \mathcal{H}_\varphi \text{の長さ 1 のベクトルで、} \varphi(A) = (\Omega_\varphi, \pi_\varphi(A)\Omega_\varphi) \text{ となる} \Omega_\varphi \end{cases}$$

すなわち、量子力学で状態と呼ばれているものと同じ形に書ける。

(2) 上の形の φ は状態の定義を満たす。

(3)Ω_φ が巡回的[2]である三つ組が存在し、そのような三つ組は本質的に（ユニタリ同値類として）一意的である (<u>GNS の三つ組</u> という。また π_φ は <u>GNS 表現</u> という)。

例　量子格子スピン系の場合：すべてのスピンが z 軸方向上向きの状態

$\varphi\left(\sigma_{\alpha_1}^{(n_1)} \ldots\ldots \sigma_{\alpha_N}^{(n_N)}\right) = \varphi\left(\sigma_{\alpha_1}^{(n_1)}\right) \ldots\ldots \varphi\left(\sigma_{\alpha_N}^{(n_N)}\right)$

$\varphi\left(\sigma_x^{(n)}\right) = \varphi\left(\sigma_y^{(n)}\right) = 0\ ,\ \varphi\left(\sigma_z^{(n)}\right) = \varphi(1) = 1$

1.4　無限系の時間発展

対称性 s(積極的解釈を持つ場合)

物理量 Q $\longrightarrow$ 物理量 sQ　　全単射

状態　$\varphi \longrightarrow$ 状態 $s\varphi$　　全単射

$f(sQ) = sf(Q)\ \ ,\ \ (s\varphi)(sQ) = \varphi(Q)$

[1]生成する：線形結合とノルム極限を追加したもの

[2]巡回的：$\pi_\varphi(\mathfrak{A})\Omega_\varphi = \{\pi_\varphi(A)(A \in \mathfrak{A})$ 全体$\}$ が $\mathcal{H}_\varphi$ で稠密

時間発展：対称性の一変数群 $\alpha_t : \alpha_{t_1}\alpha_{t_2} = \alpha_{t_1+t_2}$, $t \longrightarrow \alpha_t(A)$ 連続
数学的定理を経由して次の α_t が存在

$$\alpha_t \text{は} \mathfrak{A} \text{の自己同形群} : A \in \mathfrak{A} \longrightarrow \alpha_t(A) \in \mathfrak{A} \ \text{全単射、}^* \text{同形}$$

$$\alpha_t(A+B) = \alpha_t(A) + \alpha_t(B)\ ,\ \alpha_t(cA) = c\alpha_t(A)\ ,\ \alpha_t(AB) = \alpha_t(A)\alpha_t(B)$$

$$\alpha_t(A^*) = \alpha_t(A)^*\ ,\ \text{したがって}\ \|\alpha_t(A)\| = \|A\|$$

$$\alpha_{t_1}(\alpha_{t_2}(A)) = \alpha_{t_1+t_2}(A) \qquad (\alpha_{t_1}\alpha_{t_2} = \alpha_{t_1+t_2}\text{と書く})$$

$$t \longrightarrow \alpha_t(A)\text{連続}$$

$\frac{d}{dt}\alpha_t(A)$ が $\mathfrak{A}$ の中の極限として存在するような $A \in \mathfrak{A}$ の全体を $D(\delta)$ とすると、$\delta : A \in D(\delta) \longrightarrow \delta(A) = \frac{d}{dt}\alpha_t(A)|_{t=0}$ は*微分

$$\begin{cases} \delta\text{が}^*\text{微分}: & \delta(A+B) = \delta(A) + \delta(B)\ ,\ \delta(cA) = c\delta(A) \\ & \delta(AB) = \delta(A)B + A\delta(B) \quad (\text{Leibnitz の法則}) \\ & \delta(A^*) = \delta(A)^* \end{cases}$$

量子スピン格子系の場合

$$\mathfrak{A}_{loc} = \left\{ \text{有限個の} \sigma_{\alpha_1}^{(n_1)}, \ldots\ldots, \sigma_{\alpha_N}^{(n_N)}\ (N < \infty)\ \text{の多項式全体} \right\} \text{とおく。}$$

有限到達距離の並進不変なハミルトニアン

$$H = \sum_{n \in Z^d} \tau_n h\ ,\quad h \in \mathfrak{A}_{loc} \qquad (\tau_n \text{は格子の}\ n\ \text{だけの並進})$$

このとき $\delta_{iH}(A) = i\sum[\tau_n h\ ,\ A]$ は $A \in \mathfrak{A}_{loc}$ に対し有限和

定理　$\delta_\alpha = \delta_{iH}$ となる時間発展 α_t が一意的に存在する。
　この α_t をハミルトニアン H による時間変化という。

例　一次元 XY 模型： $d = 1$,

$$h = J\left\{(1+\gamma)\sigma_x^{(0)}\sigma_x^{(1)} + (1-\gamma)\sigma_y^{(0)}\sigma_y^{(1)} + \lambda\left(\sigma_z^{(0)} + \sigma_z^{(1)}\right)\right\}$$

$$J, \gamma, \lambda \text{は実数で、模型のパラメタ}$$

2　量子スピン格子系の熱平衡状態

2.1　有限系

ハミルトニアン H と逆温度 β を定めると

$$\varphi^G(A) = \mathrm{tr}\left(Ae^{-\beta H}\right)/Z\ ,\ Z = \mathrm{tr}\left(e^{-\beta H}\right) \quad (\mathrm{tr}\ \text{はトレース})$$

は正準分布（Gibbs 状態）とよばれ、熱平衡状態と考えられている。

2.2 無限系

H は無限和で一般に収束しない (無限系のエネルギーは無限大)。次のような（たがいに同値な）特徴づけを用いる。

$\mathfrak{A}$ と α_t は一組固定して議論する。その組は C* 力学系 と呼ばれる。

2.2.1 β-KMS 条件 (Kubo-Martin-Schwinger)

$\mathfrak{A}_{ent}$: $\alpha_t(A)$ が t の整関数であるような $A \in \mathfrak{A}$ の全体、$\mathfrak{A}$ の部分*環

定義 状態 φ がβ-KMS 状態であるとはつぎの β-KMS 条件を満たすことである。

$$\varphi(A\alpha_t(B)) = (\alpha_{t+i\beta}(B)A)$$

ただし t は任意の実数、$A \in \mathfrak{A}$, $B \in \mathfrak{A}_{ent}$ もそれぞれ任意

注 例えば有限到達距離の相互作用の場合、格子の有限領域 I の中だけの和を取ったハミルトニアンを H(I) とおき、その Gibbs 状態の $I \nearrow Z^d$ の極限での集積点（極限があればその極限）はこの条件を満たす。

2.2.2 大局的変分原理

圧力関数

$$P(H) = \lim |I|^{-1} \log \tau \left(e^{-\beta H(I)}\right)$$

ただし τは $\mathfrak{A}$ 上の一意的トレース状態、

極限は van Hove 極限（I の形状に多少の制限、立方体とか球なら OK）$I \nearrow Z^d$

定理 上の極限は存在する。

内部エネルギー密度

$$e_H(\varphi) = \lim_{I \nearrow Z^d} |I|^{-1} \varphi(H(I))$$

ただし |I| は I 内の格子点の総数

定理 並進不変な状態に対し上の極限は存在する。

エントロピー密度

$$\begin{array}{lcll} \mathfrak{A}(I) & : & \sigma_\alpha^{(n)}\ ,\ n \in I \text{ で生成される部分}*\text{環、I の物理量} \\ \rho_\varphi(I) & : & \varphi(A)\ ,\ A \in \mathfrak{A}(I) \text{ は } \mathfrak{A}(I) \text{ の状態を与える。その密度行列} \\ S_I(\varphi) & = & -\varphi\left(\log \rho_\varphi(I)\right) & \text{（I のエントロピー）} \\ s(\varphi) & = & \lim_{I \nearrow Z^d} S_I(\varphi)/|I| & \underline{\text{エントロピー密度}} \end{array}$$

定理 並進不変な状態に対し上の極限は存在する。

変分等式

$$P(\beta H) = \sup_{\varphi} (s(\varphi) - \beta e_H(\varphi))$$

定理　(変分原理) 並進不変な状態 φ については

$$\varphi : \beta\text{−KMS 状態} \longleftrightarrow P(\beta H) = s(\varphi) - \beta e_H(\varphi)$$

$$\text{自由エネルギー } F = U - TS \text{ が最小}$$

注　必ずしも並進不変でない状態については、局所的な変分原理が定式化できて、β-KMS 条件との同値性が証明できる。

2.2.3　安定性による特徴づけ

相互作用の局所摂動：

$Q = Q^* \in \mathfrak{A}$ に対し、$\delta_{\alpha'} = \delta_\alpha + \delta_{iQ}$ となる時間変化 α'_t が存在する。

これを局所摂動という。ただし $\delta_{iH}(A) = i[Q, A]$

準素状態　$\pi_\varphi(\mathfrak{A})$ の弱位相閉包が自明な中心を持つ状態。任意の状態を準素状態の積分に分解できるので、基本的な状態。

状態の安定性　C^* 力学系の定常状態 (α_t 不変な状態) のうち、任意の局所摂動に対し摂動力学系の定常状態がもとの状態の局所摂動の範囲にある (すなわち、$\mathcal{H}_\varphi$ のベクトルによる期待値で与えられる) ことをいう。

定理　(力学系にたいするある条件のもとでは) 安定な準素状態は KMS 状態 (β は任意) か基底状態である。

基底状態については次節で定義

2.2.4　化学ポテンシャル

ゲージ群 $G : \mathfrak{A}$ の*自己同形のなすコンパクト群で α_t と可換なものとする。

定理　(力学系にたいするある条件のもとで) ゲージ不変な (任意の $g \in G$ に対し $g(Q) = Q$) 任意の局所摂動に対し安定な準素状態は、G の一変数部分群 $\gamma(t)$ について力学系 $(\mathfrak{A}, \alpha_t\gamma(t))$ の KMS 状態または基底状態である。とくに粒子数に対応するゲージ群の場合、$\gamma(t)$ の違いはちょうど通常の化学ポテンシャルを与える。

3　具体的可解模型

3.1　模型 — XY 模型

$$H = J\sum_{n}\left[(1+\gamma)\sigma_x^{(n)}\sigma_x^{(n+1)} + (1-\gamma)\sigma_y^{(n)}\sigma_y^{(n+1)} + \lambda\left(\sigma_z^{(n)} + \sigma_z^{(n+1)}\right)\right]$$

$(J<0)$　γ : xy 非対称性の大きさ，λ : 外磁場の大きさ

定理　一次元格子スピン系では長距離相互作用を除いて全ての温度で平衡状態（KMS 状態）は一意的である。特に有限到達距離の相互作用の場合は、局所物理量の平衡状態での期待値はパラメタの解析関数である。

という一般的な定理により、KMS 状態は一意的である。
相関関数 $\varphi(\sigma_{\alpha_1}^{(n_1)}......\sigma_{\alpha_N}^{(n_N)})$ も具体的な形が求められている。

3.2　基底状態

定理
(1)　$\mathfrak{A}$ の*自己同形 α について不変な状態 φ $\left(\varphi(\alpha(A)) = \varphi(A)\right)$ に対し $\mathcal{H}_\varphi$ 上に次式を満たすユニタリ作用素 U_α が存在する。

$$U_\alpha\pi_\varphi(A)U_\alpha^* = \pi_\varphi(\alpha A) \quad , \quad U_\alpha\Omega_\varphi = \Omega_\varphi$$

(α_t-不変状態を定常状態ともいう)
(2)　α_t が*自己同形の一変数群のとき、各 α_t に対する (1) のユニタリ作用素 $U_{\alpha_t} = U_t$ は、次の形をしている。

$$U_t = \exp(itH_\varphi)$$

H_φ は自己共役作用素で、次式を満たす。

$$H_\varphi^* = H_\varphi \quad , \quad H_\varphi\Omega_\varphi = 0$$

定義　C^*力学系 $(\mathfrak{A}, \alpha_t)$ の状態φ がα_t-不変で、$H_\varphi \geq 0$ の時、それを基底状態という。

3.3　XY 模型の基底状態の相図

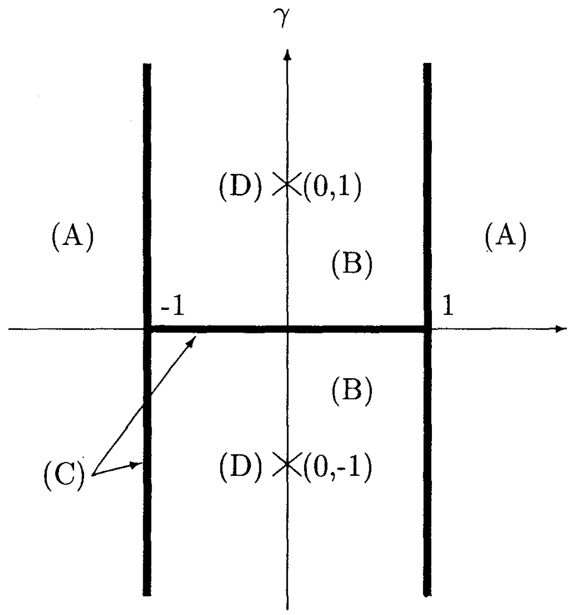
以下一般の基底状態は純粋基底状態の混合状態であるので、純粋基底状態の数をあげる。XY 模型のハミルトニアンは次の対称性（スピンの z 軸まわりの 180° 回転）Θ で不変である。

$$\Theta\left(\sigma_x^{(n)}\right) = -\sigma_x^{(n)} \quad , \quad \Theta\left(\sigma_y^{(n)}\right) = -\sigma_y^{(n)} \quad , \quad \Theta\left(\sigma_z^{(n)}\right) = \sigma_z^{(n)} \quad (n \text{ は任意})$$

純粋基底状態が Θ 不変か、この対称性が破れているか、も書く。基底状態を表す GNS ベクトル Ω_φ は GNS 表現のエネルギー作用素 H_φ のエネルギー 0 の固有ベクトルであり、

その直交補空間での H_φ のスペクトルは正または0であるが、その部分のスペクトルがある正の数 ($\neq 0$) より大きいか、そうでないか (0を含んだり、0へ収束する点列を含む) の区別 (励起エネルギーギャップあり、なし) も与える。

(A) 強外磁場 : $|\lambda| > 1$ の場合
基底状態は1個、 不変、
ギャップあり、並進不変
(B) 弱外磁場、xy 非対称 :
$|\lambda| < 1$, $\gamma \neq 0$ の場合
ただし $(\lambda, \gamma) = (0, \pm 1)$ を除く
純粋基底状態は2個、 対称性の破れ、
Θ で相互に移る。
ギャップあり、並進不変
(C) 臨界線、$|\lambda| = 1$ および $|\lambda| < 1$, $\gamma = 0$
基底状態は1個、 不変、
ギャップなし、並進不変
(D) ソリトン出現、$(\lambda, \gamma) = (0, \pm 1)$
並進不変純粋基底状態は2個、
性質は (B) と同じ
それ以外に並進不変でない純粋基底状態が無限個
二つの既約表現の (無限個の) ベクトルで表される。
それらはソリトン基底状態



XY 模型の基底状態の相図

3.4 解析性 (λ , γ の関数として)

任意の $A \in \mathfrak{A}_{\mathrm{loc}}$ に対する $\varphi(A)$ の解析性については
(A)、(B) それぞれの領域内で解析的
(D) の並進不変な2個については、(B) の解析接続
残りは正エネルギー表現の中で (B) から接続される。(後述)
(C) 分岐型特異点、

3.5 共役対称性

定義

(1) $\mathfrak{A}$ の全単射 θ が次の性質を持つ時共役自己同形という。

$$\theta(A+B) = \theta(A) + \theta(B)\ ,\ \theta(cA) = \overline{c}\theta(A)\ ,\ \theta(AB) = \theta(A)\theta(B)\ ,\ \theta(A^*) = \theta(A)^*$$

(2) 上の θ に関して状態 φ が次式を満たす時、φ は共役対称であるという。

$$\varphi(\theta A) = \overline{\varphi(A)} \quad (\text{任意の } A \text{ について})$$

次の θ_x , θ_y は共役自己同形である。

$$\theta_x\left(\sigma_x^{(n)}\right) = -\sigma_x^{(n)} \quad , \quad \theta_x\left(\sigma_y^{(n)}\right) = \sigma_y^{(n)} \quad , \quad \theta_x\left(\sigma_z^{(n)}\right) = \sigma_z^{(n)}$$

$$\theta_y\left(\sigma_x^{(n)}\right) = \sigma_x^{(n)} \quad , \quad \theta_y\left(\sigma_y^{(n)}\right) = -\sigma_y^{(n)} \quad , \quad \theta_y\left(\sigma_z^{(n)}\right) = \sigma_z^{(n)}$$

（B）の純粋基底状態は $\gamma > 0$ のとき θ_y 共役対称
$\gamma < 0$ のとき θ_x 共役対称

3.6 正エネルギー表現

定義 C* 力学系 $(\mathfrak{A}, \alpha_t)$ の $\mathcal{H}$ 上の表現 π について、表現空間上に次式を満たす自己共役作用素 H_π がある場合、π を正エネルギー表現という。

$$e^{itH_\pi}\pi(A)e^{-itH_\pi} = \pi(\alpha_t A) \ , \ H_\pi \geq 0$$

（注） 基底状態の GNS 表現は正エネルギー表現である。

XY 模型の既約正エネルギー表現の個数（既約性は純粋状態に対応）:
（A）の場合： 1 個
（B）の場合： 4 個
（C）の場合： 無限個（基底表現以外に赤外表現）
（D）の場合： 4 個

(A)、(D) の場合は全部基底状態の GNS 表現である。(A) の領域、(B) および (D) の領域の中でそれぞれある意味でパラメタについて解析的である。

- (B) の場合は 2 個だけ、(C) の場合は 1 個だけ 基底状態の GNS 表現
- (B) の残りの 2 個はソリトン表現
- (C) の場合には無限個の赤外表現が含まれる。